

# РЕШЕНИЕ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРЕ ЗАДАЧ 3D НЕЛИНЕЙНОЙ ВОЛНОВОЙ ТОМОГРАФИИ СО СВЕРХВЫСОКИМ РАЗРЕШЕНИЕМ

С.Ю. Романов

**1. Введение.** Настоящая работа посвящена разработке методов решения трехмерных нелинейных коэффициентных обратных задач волновой томографии со сверхбольшим объемом данных и сверхвысоким разрешением на суперкомпьютерах. Разрабатываемые методы позволят использовать томографические подходы в таких приложениях как неразрушающий контроль в промышленности, медицинская ультразвуковая томография, сейсморазведка и т. д. [1-4].

Важной проблемой для волновой томографии является необходимость разработки алгоритмов решения обратных задач в рамках моделей, с высокой точностью описывающих физический процесс распространения волн в неоднородных средах. Высокая точность моделей — необходимое условие для решения задач волновой томографии со сверхвысоким разрешением. Среди физических явлений, которые имеют место при распространении волн необходимо отметить эффекты дифракции, рефракции, отражения, переотражения и т.д. Все эти эффекты можно описать в рамках волнового уравнения. В этом случае обратная задача является коэффициентной обратной задачей.

В настоящей работе предлагается использовать подход, основанный на решении нелинейной коэффициентной обратной задачи для волнового уравнения с помощью прямого вычисления градиента функционала невязки через решение сопряженной задачи для уравнения в частных производных. Наиболее продвинутые результаты в использовании этого подхода получены в работах [5-8].

Обратные задачи волновой томографии в трехмерном пространстве являются очень сложными с вычислительной точки зрения. В конкретных приложениях, например, ультразвуковой томографии в медицине для получения сверхвысокого разрешения необходимо решать задачу восстановления трехмерной функции на сетках начиная с размера порядка 500x500x500 точек. Таким образом, необходимо решать нелинейную коэффициентную обратную задачу с общим числом неизвестных более 100 млн. Решение столь масштабных задач, приводит к необходимости проведения расчетов на мощных суперкомпьютерах. Одна из задач эффективного использования супер-ЭВМ состоит в выборе численных методов и алгоритмов, допускающих высокомасштабируемое распараллеливание задачи. Предложена вычислительная процедура с использованием явной разностной схемы решения обратной задачи волновой томографии, имеющая высокую степень параллелизма на сверхбольших объемах данных.

В области создания 3D алгоритмов существует сравнительно небольшое количество работ, и по большей части они выполнены в линейных моделях [9-14].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований проект № 12-07-00304-А.

**2. Постановка и методы численного решения прямой и обратной задачи.** Существуют различные постановки коэффициентных обратных задач для уравнений гиперболического типа [15,16]. Рассмотрим волновое уравнение, которое описывает акустическое поле  $u(r, t)$  в течение времени  $(0, T)$  в области  $\Omega \subset R^3$ , ограниченной поверхностью  $S$ , с точечным источником, располагающимся в точке  $r_0$  [8,17,18]

$$c(r)u_{tt}(r, t) - \Delta u(r, t) = \delta(r - r_0) \cdot f(t)$$

$$u(r, t = 0) = u_t(r, t = 0) = 0 \tag{1}$$

$$\partial_n u|_{ST} = p(r, t)$$

Здесь  $c^{-0.5}(r)$  - является скоростью волны в среде,  $r \in R^3$  - положение точки в пространстве,  $\Delta$  - оператор Лапласа по переменной  $r$ . Генерируемый источником импульс описывается функцией  $f(t)$ ,  $\partial_n u|_{ST}$  - производная вдоль нормали к поверхности  $S$  в области  $S \times (0, T)$ ,  $p(r, t)$  - некоторая известная функция. Будем предполагать, что неоднородность содержится в  $\Omega$ , а вне области неоднородности  $c(r) \equiv const$ , где  $const$  - известна.

Волновое уравнение (1) эффективно описывает волновые эффекты. Эта модель является простейшей, но даже в этой модели решение обратных задач волновой томографии связано с необходимостью решения нелинейных некорректно поставленных задач. Обратная задача состоит в нахождении функции  $c(r)$ , описывающей неоднородность, по экспериментальным данным измерения волны  $U(s, t)$  на границе  $S$  области  $\Omega$  за время  $(0, T)$  при различных положениях  $r_0$  источника.

Введем функционал невязки

$$\Phi(u(c)) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_S (u(s,t) - U(s,t))^2 ds dt \quad (2)$$

Здесь  $U(s,t)$  - экспериментальные данные на границе  $S$  области  $\Omega$  за время  $(0, T)$ .

Прорывные результаты в области решения задач волновой томографии связаны с возможностью вычисления градиента функционала  $\Phi(u(c))$ . В похожих постановках выражение для градиента функционала  $\Phi(u(c))$  получены в работах [5-7]. Градиент  $\Phi'(u(c))$  имеет вид

$$\Phi'_C(u(c), c) = \int_0^T w_t(r, t) u_t(r, t) dt \quad (3)$$

Здесь  $u(r, t)$  - есть решение основной задачи (1), а  $w(r, t)$  - есть решение следующей «сопряженной» задачи (4) при заданном  $c(r)$

$$\begin{aligned} c(r) w_{tt}(r, t) - \Delta w(r, t) &= 0 \\ w(r, t = T) = w_t(r, t = T) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

$$\partial_n w|_{ST} = u|_{ST} - U$$

Таким образом, для вычисления градиента функционала необходимо решить основную и «сопряженную» задачи. Зная  $\Phi'_C$  из (3), можно построить различные итеративные схемы для минимизации функционала невязки (2). В настоящей работе использовался метод наискорейшего спуска, в котором на каждой итерации на направлении указанном градиентом численно решалась одномерная задача поиска минимума.

**3. Дискретизация задачи, численный алгоритм.** Для решения трехмерной обратной задачи будем использовать метод конечных разностей на равномерных сетках. В такой постановке решение дифференциальных уравнений сводится к решению разностных уравнений. На области изменения аргументов введем равномерную дискретную сетку

$$v_{ijkl} = \{(x_i, y_j, z_l, t_k) : x_i = ih, 0 \leq i < n; y_j = jh, 0 \leq j < n; z_l = lh, 0 \leq l < n; t_k = k\tau, 0 \leq k < m\},$$

где  $h$  – шаг сетки по пространственным переменным,  $\tau$  - шаг сетки по времени. Параметры  $h$  и  $\tau$  связаны условием устойчивости Куранта  $c^{-0.5}\tau < \frac{h}{\sqrt{3}}$ . Аппроксимации производных 2-го порядка в уравнении (1) имеют вид

$$\begin{aligned} u_{tt}(x_i, y_j, z_l, t_k) &= \frac{u_{ijkl+1} - 2u_{ijkl} + u_{ijkl-1}}{\tau^2}, \\ \Delta u(x_i, y_j, z_l, t_k) &= \frac{u_{i+1jlk} - 2u_{ijkl} + u_{i-1jlk}}{h^2} + \frac{u_{ij+1lk} - 2u_{ijkl} + u_{ij-1lk}}{h^2} + \frac{u_{ijl+1k} - 2u_{ijkl} + u_{ijl-1k}}{h^2}. \end{aligned}$$

Здесь  $u_{ijkl} = u(x_i, y_j, z_l, t_k)$ . В области, не содержащей источников, получаем явную разностную схему для дифференциального уравнения (1)

$$\begin{aligned} u_{ijkl+1} &= u_{ijkl} \left( 2 - \frac{8\tau^2}{c_{ijl} h^2} \right) + \frac{(u_{i+1jlk} + u_{i-1jlk})\tau^2}{c_{ijl} h^2} + \frac{(u_{ij+1lk} + u_{ij-1lk})\tau^2}{c_{ijl} h^2} + \\ &+ \frac{(u_{ijl+1k} + u_{ijl-1k})\tau^2}{c_{ijl} h^2} - u_{ijkl-1} \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь  $c_{ijl}$  – значения  $c(x_i, y_j, z_l)$  в точке  $(x_i, y_j, z_l)$ . В качестве граничных условий для модельных расчетов в настоящей статье выбиралось условие неотражения на границе

$$\partial_n u|_{ST} = -c^{0.5} \partial_t u|_{ST} \quad (6)$$

Аналогично выписывается разностная схема для  $w$  «в обратном времени». Время  $T$  выбирается достаточно большим, так чтобы все основные отражения и переотражения от исследуемого объекта успевали

дойти до приемников. Граничное условие из (4) в разностной аппроксимации, например, на грани  $z=zn$  (для границы S имеющей форму границы куба) записывается в виде

$$\frac{w_{ijl+1k} - w_{ijl-1k}}{2h} = u_{ijlk} - U_{ijlk}.$$

Градиент (3) функционала (2) вычислялся по разностной формуле

$$grad_{ijl} = \sum_{k=0}^m \frac{u_{ijlk+1} - u_{ijlk}}{\tau} \frac{w_{ijlk+1} - w_{ijlk}}{\tau} \tau \quad (7)$$

Опишем метод наискорейшего спуска. Итерационная последовательность  $c^{(n)}$  для минимизации функционала невязки (2) строится следующим образом.

1. В качестве начального приближения используется  $c^{(0)} = c_0 = const$ .
2. Для  $c^{(0)}$  решается прямая задача (1) в разностной аппроксимации. С помощью явной разностной схемы (5) решается прямая задача вычисления значения  $u(r, t)$  на каждом из детекторов.
3. Для функции  $u(r, t)$ , полученной на каждом из детекторов, решается сопряженная задача (4) в разностной аппроксимации. В результате получаем  $w(r, t)$  в каждой точке сетки.
4. Используя полученные значения  $u(r, t)$  и  $w(r, t)$ , вычисляется градиент  $\Phi'_C(u(c^{(0)}))$  (3) функционала по формуле (7).
5. Зная градиент в точке  $c^{(0)}$ , находится минимум функционала  $\Phi(c^{(0)} - \gamma \Phi'_C(c^{(0)}))$  по параметру  $\gamma$  в области  $\gamma > 0$ .
6. Точка минимума функционала принимается за  $c^{(1)}$ . Процесс возвращается к пункту 2.

**4. Модельные расчеты на суперкомпьютере.** Обратные задачи волновой томографии в трехмерном пространстве являются очень сложными с вычислительной точки зрения. Для получения сверхвысокого разрешения необходимо решать задачу восстановления трехмерной функции  $s(x, y, z)$  на сетках начиная с размера порядка 500x500x500 точек. Таким образом, необходимо решать нелинейную коэффициентную обратную задачу с общим числом неизвестных более 100 млн. С целью экономии вычислительных ресурсов модельные задачи решались на сетке 400x400x400 точек.

Минимальный размер сетки определяется тем, что, например, при решении актуальной задачи ультразвуковой томографии диагностики рака молочной железы необходимо иметь разрешение минимум 2-3 мм на области не менее 15x15x15 см. Кроме того, при решении обратной задачи проводится расчет прямой задачи распространения волны по явной разностной схеме. Для получения расчетов с высокой точностью количество точек на длину волны должно быть не менее 10-20. При центральной длине волны зондирующего импульса ~ 5 мм это приводит к сеткам начиная с 500 точек на 15 см области.

Рассматриваемая вычислительная процедура с использованием явной разностной схемы решения обратной задачи волновой томографии имеет высокую степень параллелизма по данным, поскольку новые значения во всех точках сетки дискретизации, за исключением граничных, для нового временного слоя как в «прямой», так и в «сопряженной» задаче вычисляются по одинаковой схеме и не зависят друг от друга. Такие алгоритмы называются SIMD алгоритмами (Single instruction – multiple data), и для их реализации в последнее время широко используются вычислительные устройства с параллельной архитектурой.

Для решения рассматриваемой задачи использовался суперкомпьютер «Ломоносов» Суперкомпьютерного центра Московского государственного университета. Расчеты проводились на 13 GPU. Использование суперкомпьютера позволило решать обратную задачу волновой томографии как задачу восстановления трехмерной функции скорости за время порядка 1-2 часа при выбранных значениях параметров.

Для расчетов использовалась математическая модель, описываемая уравнением (1).

На Рис.1 приведена схема модельного эксперимента по волновой томографической диагностике исследуемой области G, содержащей неоднородности. Область G расположена внутри расчетного куба и окружена средой L с известной скоростью  $v_0 = const$ . На гранях куба располагаются источники и приемники волновых импульсов.

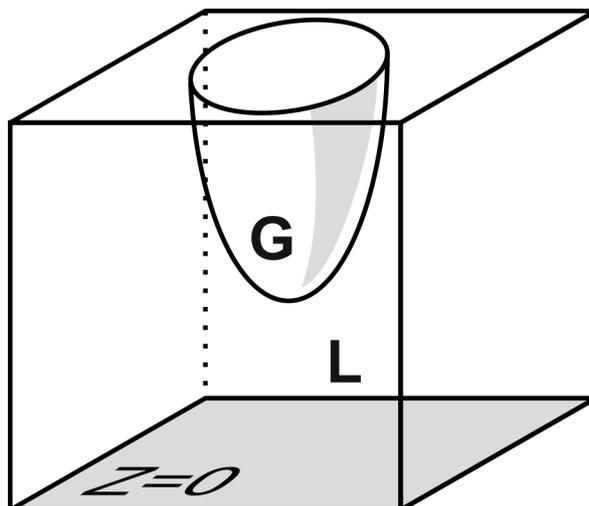


Рис. 1. Схема эксперимента. G – исследуемая область, L – область с известной скоростью  $v_0$

В качестве фантома для модельных исследований использовался неоднородный по структуре трехмерный объект размером до  $20\lambda$  ( $\lambda$  – центральная длина волны зондирующего импульса), в котором изменение скорости распространения волны варьировалось в пределах 10%. Минимальный размер неоднородности  $\lambda/2$ . Размер куба волнового зондирования по горизонтальным и по вертикальной координатам –  $25\lambda$ . Расчеты проводятся на равномерной сетке внутри куба, количество точек сетки по горизонтальным и по вертикальной координатам –  $400 \times 400 \times 400$  точек.

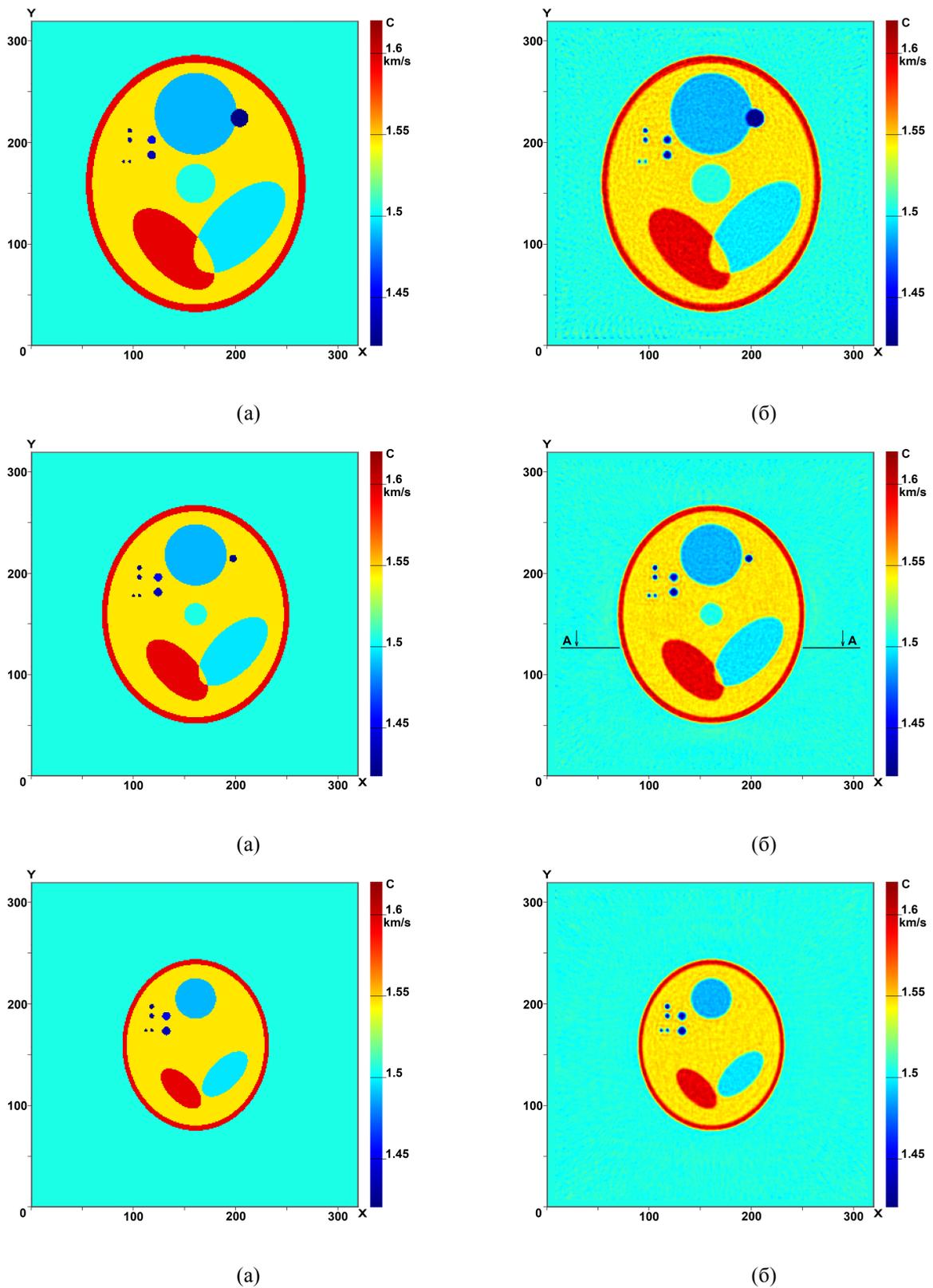
В модельных расчетах зондирующий импульс задается в некоторый момент времени  $t_1 > 0$  в виде сферически распространяющегося широкополосного импульса, локализованного в момент времени  $t_1$  в среде L. Зондирующий импульс в следующий момент времени  $t_1 + \tau$  нетрудно найти аналитически. Значение поля в момент времени  $t_1$  и в момент  $t_1 + \tau$  задают начальные условия расчетов. Зондирующий импульс имеет компактный носитель, приблизительно равный двум длинам волн. Характерной особенностью всех импульсов является наличие некоторых переколебаний. Чем меньше переколебания, тем лучше. В идеализированном варианте переколебания отсутствуют.

Соотношение между шагом сетки расчетов и длительностью зондирующего импульса таково, что на один период импульса приходится 25 точек сетки по пространственным координатам, что обеспечивает хорошую аппроксимацию для численного вычисления лапласиана. Сетка по  $t$  диктуется соотношением Куранта  $c^{-0.5}\tau < \frac{h}{\sqrt{3}}$ , обеспечивающим сходимость явной схемы. Параметр Куранта выбран равным 0.25.

В модельных расчетах использовались 6 источников, расположенных по центрам каждой их граней куба, при большом количестве приемников, покрывающих каждую из граней (Рис. 1). Расстояние между приемниками на гранях куба порядка  $\lambda/2$ .

В ходе модельных экспериментов по восстановлению 3D неоднородности прямая задача распространения волны в трехмерной области решалась без внесения дополнительной ошибки по явной формуле (5) с граничными условиями (6) и начальными условиями, задающими зондирующий импульс. По полученным данным решалась обратная задача восстановления функции скорости  $v(x, y, z)$ .

На Рис. 2-4 (а,б) для скалярной функции скорости  $v(x,y,z)$ , зависящей от трех пространственных координат, приведены сечения, проходящие через объект G в четырех различных плоскостях, перпендикулярных оси Z при различных значениях  $z = z_i$  ( $i = 1, \dots, 3$ ). Слева приведены сечения фантома, справа – результаты восстановления изображений. Рисунки снабжены цветовой шкалой значений функции скорости. Восстановленные сечения получены на 120 итерации итерационного процесса. Видно, что качество реконструкции очень высокое, достаточно хорошо восстанавливаются даже неоднородности малого размера  $\sim \lambda/2$ .

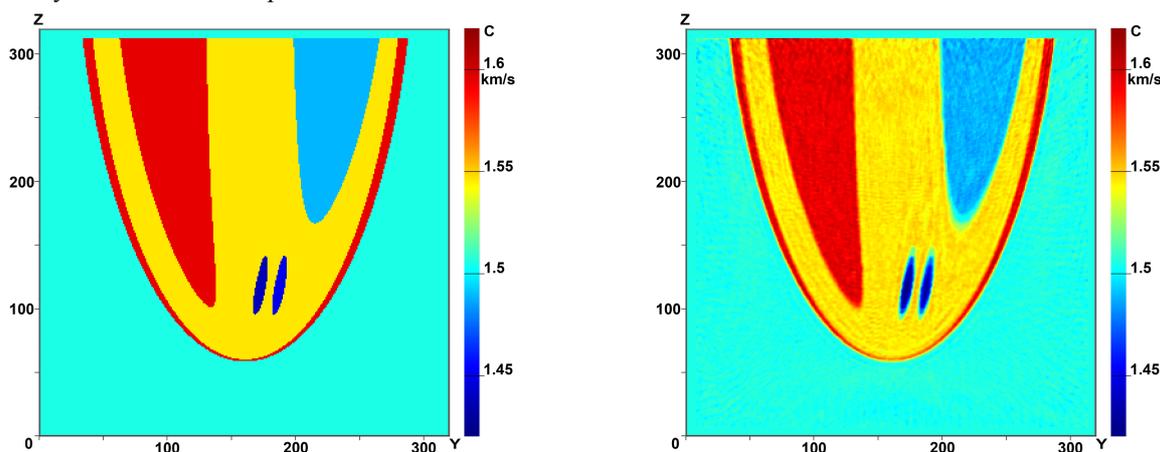


Рису 2-4 (а, б). Слева – сечения фантома 3D объекта, справа - восстановленные сечения 3D объекта. Сечения перпендикулярны оси  $Z$

На Рис. 5 (а,б) приведено сечение, проходящее через исследуемую неоднородность, в плоскости перпендикулярной оси  $X$ . Слева приведено сечение фантома, справа - результат реконструкции. В этом сечении неоднородности имеют вытянутую форму. Качество реконструкции также высокое.

Видно, что разработанные алгоритмы позволяют восстанавливать не только форму неоднородности, но и с достаточной точностью получать абсолютные значения скоростей.

В качестве начального приближения при всех расчетах использовалось  $c^{(0)} = \text{const}$ . В Таблице 1 приведены значения функционала невязки для 5, 15 и 120 итераций. Видно, что функционал невязки за 120 итерации уменьшился в 100 раз.



Рису 5 (а, б). Слева - сечения фантома 3D объекта, справа - восстановленные сечения 3D объекта. Сечение параллельно оси Z

Таблица 1. Значения функционала невязки.

Число итераций	5	15	120
Функционал невязки 6 источников	$1.05 \cdot 10^{-2}$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$3.026 \cdot 10^{-4}$

Значение функционала невязки  $\sim 3 \cdot 10^{-4}$ , соответствующее уровню ошибки сигналов детекторов  $\sim 0.3\%$ , было достигнуто примерно за 2 часа. Метод наискорейшего спуска обеспечивает монотонное убывание функционала невязки. Функционал невязки вначале убывает достаточно быстро, а с увеличением итераций скорость убывания заметно уменьшается.

Расчеты проводились на 6 GPU суперкомпьютера "Ломоносов", один процессор проводит расчеты для одного источника зондирования. Поскольку расчеты для каждого источника практически независимы, то ускорение по сравнению с одним процессором приближается к 6 раз.

## 5. Выводы.

1. Предложены эффективные численные алгоритмы решения 3D обратных задач волновой томографии как коэффициентных обратных задач для волнового уравнения. Алгоритмы основаны на возможности точного вычисления градиента функционала невязки.
2. Разработанное программное обеспечение для суперкомпьютеров решает задачи со сверхбольшим объемом данных (6 источников, приемники через  $\approx 1\text{ м}$ , оцифровка по времени 20 отсчетов на длину волны,  $400 \times 400 \times 400$  точек сетки в области расчетов).
3. Разработанные алгоритмы позволяют не только восстанавливать форму неоднородности и имеют высокое разрешение меньше длины волны  $\approx \lambda$ , но и с достаточной точностью получать абсолютные значения скоростей.

## ЛИТЕРАТУРА:

1. Öz. Yilmaz, Seismic data analysis, Society of Exploration Geophysicists. ISBN 1-56080-094-1. (2001).
2. J. Wiskin, D. T. Borup, S. A. Johnson, and M. Berggren. Non-linear inverse scattering: High resolution quantitative breast tissue tomography, - J. Acoust. Soc. Am. Volume 131, Issue 5, pp. 3802-3813 (2012);
3. Glide-Hurst CK, Duric N, Littrup P. Volumetric breast density evaluation from ultrasound tomography images. Medical Physics 2008; 35:3988-3997.
4. R. Jifík, I. Peterlík, N. Ruiter, J. Fousek, R. Dapp, M. Zapf, J. Jan "Sound-Speed Image Reconstruction in Sparse-Aperture 3-D Ultrasound Transmission Tomography" // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 2012. 59, N 2, с.254-264.
5. Chavent G. Deux resultats sur le probleme inverse dans les equations aux derivees partielles du deuxieme ordre an t et sur l'unicite de la solution du probleme inverse de la diffusion // Paris. C.R.Acad.Sc. 1970. Vol.270. P.25-28.
6. Natterer F., Wubbeling F., A propagation-backpropagation method for uzltrasound tomography. Inverse Problems 11, 1225-1232 (1995) IOP Publishing Ltd.

7. L. Beilina, M.V. Klibanov "Approximate global convergence and adaptivity for coefficient inverse problems". New York: Springer, 2012.
8. A.V. Goncharsky, S.Y. Romanov, Supercomputer technologies in inverse problems of ultrasound tomography Inverse Probl. 2013, V. 29, № 7, 075004.
9. N.V.Ruiter, G.F.Schwarzenberg, M.Zapf, A.Menshikov, H. Gemmeke. Results of an experimental Study for 3D Ultrasound CT, NAG/DAGA 2009 International Conference on Acoustics 1 305–309.
10. M. André, J. Wiskin, D. Borup, S. Johnson, H. Ojeda-Fournier, L. Olson, Quantitative volumetric breast imaging with 3D inverse scatter computed tomography, Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc. 2012 1110-1113.
11. A.Backushinsky, A.Goncharsky, S.Romanov, S.Seatzu,- On the identification of velocity in seismics and in acoustic sounding.-Pubblicazioni dell'istituto di analisa globale e applicazioni, Serie "Problemi non ben posti ed inversi», N 71, Firenze, November 1994.
12. С.Г. Головина, С.Ю. Романов, В.В. Степанов "Об одной обратной задаче сейсмоки" // Вестн. МГУ. Сер. 15. Выч. мат. и киб. 1994. № 4, с.16–21.
13. Гончарский А.В., Романов С.Ю. Об одной трехмерной задаче диагностики в волновом приближении.- ЖВМиМФ, 2000 , Т40, №9. С. 1364-1367
14. А.Б. Бакушинский, А.И. Козлов, М.Ю. Кокурин "Об одной обратной задаче для трехмерного волнового уравнения" // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2003. 43, № 8, с.1201–1209.
15. O. Roy, I. Jovanovi'c, A. Hormati, R. Parhizkar, M. Vetterli, Sound Speed Estimation Using Wave-based Ultrasound Tomography:Theory and GPU Implementation, Proc. SPIE 7629, Medical Imaging 2010: Ultrasonic Imaging, Tomography, and Therapy, 76290J (March 12, 2010).
16. А.В. Гончарский, С.Ю. Романов "О двух подходах к решению коэффициентных обратных задач для волновых уравнений" // Журн. вычисл. матем. и матем. физики. 2012. 52, № 2, с.1–7.
17. А.В. Гончарский, С.Ю. Романов "Суперкомпьютерные технологии в разработке методов решения обратных задач в УЗИ-томографии" //Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. с.235-238.
18. Вад. В.Воеводин, С.Л. Овчинников, С.Ю. Романов "Разработка высокоэффективных масштабируемых программ в задаче ультразвуковой томографии" // Вычислительные методы и программирование. 2012. Т.13. №1, с.307-315.